

**MESTRADO EM FÍSICA**  
**(Perfis: Física Fundamental e Física Aplicada)**

**Edição – 2014/2015**

*Proposta de tese*

**Título/Tema:** Propriedades electrónicas e ópticas de dicalcogenetos de metais de transição

**Orientadores:** Nuno Miguel Machado Reis Peres (UM), Ricardo Mendes Ribeiro (UM), Eduardo Vieira de Castro (IST). (O aluno deverá fazer algumas viagens a Lisboa.)

**Tel./e-mail:** peres@fisica.uminho.pt

**Objetivos:**

Calcular a estrutura de bandas dos seguintes materiais MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub> e WSe<sub>2</sub>, na aproximação de tight-binding usando o modelo de 11 e de 5 bandas. Ajustar as bandas a cálculos de ab-initio. Obter o hamiltoniano efectivo e calcular as propriedades ópticas lineares e não lineares.

**Resumo:**

Os dicalcogenetos de metais de transição são sistemas de matéria condensada que podem surgir na forma bidimensional. Dependendo do sistema eles podem ser semicondutores ou metálicos. Um dos sistemas mais estudado é o **MoS<sub>2</sub>**. Para desenvolver o modelo de tight-binding é necessário estudar a parametrização de Slater-Koster. A física de baixa energia é descrita por um modelo de electrões de Dirac com massa em torno do ponto K da zona de Brillouin. Como esse modelo podemos calcular as propriedades ópticas usando o formalismo de segunda quantificação. A quantidade a calcular é a condutividade óptica do sistema.

**Assinatura**

Nuno Peres

**Data**

31 de Março de 2014